

PR-94

ИССЛЕДОВАНИЕ АГРЕГАЦИИ МОЛЕКУЛ ПО ИХ ПЕРЕКРЫВАЮЩИМСЯ СПЕКТРАМ ПОГЛОЩЕНИЯ: СВЯЗЫВАНИЕ ТОПОТЕКАНА И ФЛАВИНМОНОНУКЛЕОТИДА

Е. В. Шупова, В. А. Сало, А. С. Бучельников

Севастопольский государственный университет,
299053, Россия, г. Севастополь, ул. Университетская, 33
E-mail: tolybas@rambler.ru

Одним из наиболее важных направлений в биофизической химии является поиск адекватных математических моделей межмолекулярной агрегации и количественное определение с их помощью термодинамических параметров агрегации, в первую очередь равновесной константы ассоциации. Широко распространенным методом определения этих параметров является так называемый эксперимент титрованием, т. е. последовательное разбавление исходной смеси раствором титранта и регистрация наблюдаемого параметра (применительно к спектрофотометрическому титрованию – спектра поглощения смеси).

Как правило, в данном типе эксперимента компоненты подбираются таким образом, чтобы их индивидуальные спектры поглощения находились в различных диапазонах длин волн. Однако при решении реальных задач исследователь сталкивается с ситуацией, когда спектры компонентов перекрываются частично либо полностью. В этом случае требуется особый подход, основанный на анализе разностных спектров.

Целью настоящей работы было определение равновесной константы агрегации двух веществ, индивидуальные спектры поглощения которых лежат практически в одном и том же диапазоне длин волн – это смесь антибиотика топотекана и водорастворимого аналога витамина В₂, натриевой соли флавинмононуклеотида (рис. 1).

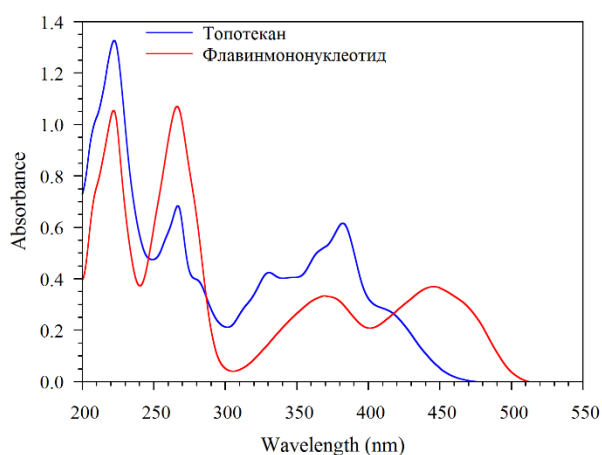


Рисунок 1

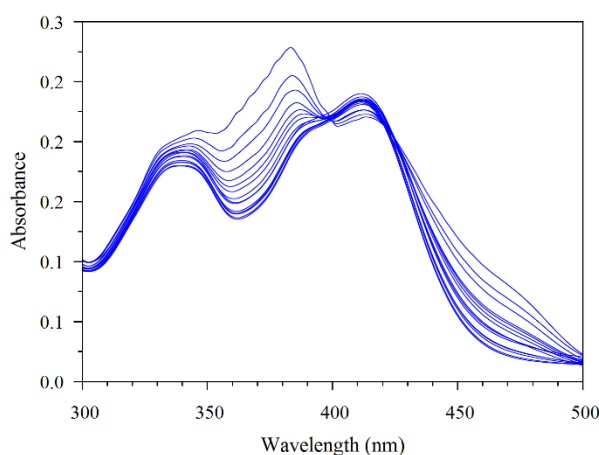


Рисунок 2

Эксперимент заключался в регистрации оптической плотности смеси топотекана и флавинмононуклеотида при фиксированной концентрации первого и уменьшающейся концентрации второго. При этом в кювете сравнения проходило синхронное разбавление раствора флавинмононуклеотида. Характерные изменения спектра чистого топотекана однозначно указывают на наличие агрегации между исследуемыми молекулами (рис. 2).

Расчетное значение константы ассоциации двух веществ составило 55 л/ммоль, что, однако, является сильно завышенной оценкой. Причиной такого завышения, по-видимому, является дополнительная стабилизация комплекса переносом заряда, идентифицируемого по появлению дополнительной полосы поглощения в районе 475 нм (рис. 2).